Projekt 12: Einführung in *Fast Multipole*

Motivation: Vollbesetzte Matrizen können "datenschwach" realisiert werden.
Wir betrachten die Matrizen $M \in \mathbb{R}^{N\times N}$

$$M_{ij} = \begin{cases} K(x_i, x_j), & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases} \qquad \text{mit} \qquad x_i = (i-1)h, \qquad h = \frac{1}{N-1}. \tag{1}$$

Hier ist die Funktion K gegeben durch

$$K(x, y) = \ln|x - y|. \tag{2}$$

Eine naive Abspeicherung dieser Matrizen benötigt N^2 Einträge; insbesondere werden $O(N^2)$ Rechenoperationen für die Matrix-Vektor-Multiplikation $x \mapsto Mx$ benötigt. Ziel dieses Projektes ist es, effiziente Methoden kennenzulernen, mit denen der Speicherbedarf zur Darstellung (einer Approximation) der Matrix M nur $O(N \log N)$ ist.
Die hier vorgestellten Techniken sind eine vereinfachte Form der sog. Multipolverfahren, mit denen u.a. Vielteilchenproblem (z.B. die Newton'schen Bewegungsgleichungen von $N = 10^6$ bis 10^8 Sternen in einer Galaxie unter dem Einfluß ihrer Gravitationsfelder) gerechnet werden.

1. Sei $\mathbb{P}_n$ der Raum der Polynome vom Grad $\leq n$. Mit $\mathbb{P}_n^{2D} = \text{span}\{x^i y^j \mid 0 \leq i, j \leq n\}$ bezeichnen wir den Raum der Polynome vom Grad $\leq n$ in jeder Variablen. Sei $I_n : C([0,1]) \to \mathbb{P}_n$ ein Interpolationsoperator mit Lebesguekonstante Λ_n. Definieren Sie I_n^x, I_n^y, I_n^{2D} durch

$$(I_n^x f)(x, y) = (I_n f(\cdot, y))(x), \qquad (I_n^y f)(x, y) = (I_n f(x, \cdot))(y), \qquad I_n^{2D} := I_n^x \circ I_n^y$$

a) Seien x_i, $i = 0, \ldots, n$ die Interpolationspunkte, auf denen I_n beruht. Geben Sie I_n^x, I_n^y, I_n^{2D} explizit an. Zeigen Sie: $I_n^{2D} : C([0,1]^2) \to \mathbb{P}_n^{2D}$, und I_n^{2D} ist ein linearer Operator.

b) Zeigen Sie: $I_n^x \circ I_n^y = I_n^y \circ I_n^x$.

c) Zeigen Sie:

$$\|u - I_n^{2D} u\|_{C([0,1]^2)} \leq (1 + \Lambda_n)^2 \inf_{\pi \in \mathbb{P}_n^{2D}} \|u - \pi\|_{C([0,1]^2)}.$$

d) Für ein beliebiges Intervall $I \subset \mathbb{R}$ wird der skalierte Interpolationsoperator $I_{n,I} : C(I) \to \mathbb{P}_n$ durch die "natürliche" Variablensubstitution definiert. Formal: $I_{n,I} f := (I_n(f \circ L)) \circ L^{-1}$, wobei $L : [0,1] \to I$ die affine Bijektion ist. Analog wird der 2D-Produktinterpolationsoperator auf einem beliebigen Rechteck $I_x \times I_y$ definiert durch $I_{n,I_x \times I_y}^{2D} = I_{n,I_x}^x \circ I_{n,I_y}^y$. Zeigen Sie: Für beliebige Intervalle I, I_x, I_y gilt

$$\|u - I_{n,I} u\|_{C(I)} \leq (1+\Lambda_n) \inf_{\pi \in \mathbb{P}_n} \|u - \pi\|_{C(I)}, \qquad \|u - I_{n,I_x \times I_y}^{2D} u\|_{C(I)} \leq (1+\Lambda_n)^2 \inf_{\pi \in \mathbb{P}_n^{2D}} \|u - \pi\|_{C(I)}$$

2. **a)** Sei $a > 0$ und $d \geq 2a$. Zeigen Sie für die Funktion $f : r \mapsto \ln r$, daß auf $[d, d + 2a]$ gilt: Es existieren Konstanten $C > 0$, $q \in (0,1)$, welche *nicht* von a, d, n abhängen, so daß

$$\inf_{\pi \in \mathbb{P}_n} \|f - \pi\|_{C([d,d+2a])} \leq C q^n \qquad \forall n \in \mathbb{N}.$$

b) Seien I_x, $I_y \subset \mathbb{R}$ zwei Intervalle der Länge $a > 0$ mit $d := \mathrm{dist}(I_x, I_y) \geq 2a$. Zeigen Sie, daß die Funktion K aus (2) auf $I_x \times I_y$ gut mit Polynomen approximiert werden kann:

$$\inf_{\pi \in \mathbb{P}_n^{2D}} \|K - \pi\|_{C([I_x \times I_y])} \leq Cq^n.$$

hier hängen $C > 0$, $q \in (0,1)$ wieder *nicht* von a und d ab. (*Hinweis:* Nehmen Sie an, daß I_x links von I_y liegt und betrachten Sie $(x,y) \mapsto \ln(x-y)$ und verwenden Sie Teilaufg. a)).

Folgern Sie für für den skalierten Tschebyscheffinterpolanten $I_{n,I_x \times I_y}^{2D,Tsch}$ und geeignete Konstanten $C > 0$, $\widetilde{q} \in (0,1)$:

$$\|K - I_{n,I_x \times I_y}^{2D,Tsch} K\|_{C([I_x \times I_y])} \leq C\widetilde{q}^n.$$

3. Wir zeigen nun, daß Matrizen M von der Bauart (1) mit *glattem* K gut durch Matrizen mit kleinem Rang approximiert werden können. Als Beispiel betrachten wir

$$K^{glatt}(x,y) := e^{x+y} \tag{3}$$

und die Matrix M^{glatt} ist definiert durch $M_{ij}^{glatt} = K^{glatt}(x_i, x_j)$ mit $x_i = (i-1)h$, $h = \frac{1}{N-1}$.

a) Zeigen Sie für den 2D Tschebyscheffinterpolationoperator $I_n^{2D,Tsch}$ gilt

$$\|K^{glatt} - I_n^{2D,Tsch} K^{glatt}\|_{C([0,1]^2)} \leq Cq^n$$

für geeignetes $C > 0$, $q \in (0,1)$. Approximieren Sie M^{glatt}, indem Sie die Funktion K^{glatt} durch Ihre Tscheybscheffinterpolante ersetzen:

$$M_{ij}^{glatt,n} := I_n^{2D,Tsch} K^{glatt}(x_i, x_j), \qquad i,j = 1, \ldots, N.$$

b) Zeigen Sie: Es gilt für den Fehler $\|M^{glatt} - M^{glatt,n}\|_F \leq Cq^n N$, wobei $C > 0$ und $q \in (0,1)$ nicht von n und N abhängen. Hier ist $\|\cdot\|_F$ die Frobeniusnorm

$$\|B\|_F := \sqrt{\sum_{i,j} |B_{ij}|^2}.$$

c) Zeigen Sie: $M^{glatt,n}$ ist eine Matrix mit Rang (höchstens) $n+1$. Insbesondere läßt sie sich darstellen in der Form

$$M^{glatt,n} = WSV^\top, \qquad W, V \in \mathbb{R}^{N \times (n+1)}, \qquad S \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)} \tag{4}$$

Hier ist

$$S_{ij} = K^{glatt}(\xi_i^{Tsch}, \xi_j^{Tsch}), \qquad i,j = 0, \ldots, n,$$

wobei ξ_i^{Tsch}, $i = 0, \ldots, n$ die auf $[0,1]$ skalierten Tschebyscheffpunkte sind. Geben Sie die Matrizen W, V an. Wieviel Speicher (d.h. `double precision` Zahlen) benötigen Sie, um die Matrizen W, V, S abzuspeichern?

4. **a)** Für die Funktion K aus (2) ist der Approximationsfehler $K - I_{n,[0,1]\times[0,1]}^{2D,Tsch} K$ groß auf $[0,1]^2$. Jedoch läßt sich K *stückweise* durch seine Tschebyscheffinterpolante gut approximieren. Zeigen Sie: Falls zwei Intervalle I_x, $I_y \subset [0,1]$ die Zulässigkeitsbedingung

$$\max\{\mathrm{diam} I_x, \mathrm{diam} I_y\} \leq \frac{1}{2}\mathrm{dist}(I_x, I_y) \tag{5}$$

erfüllen, dann gilt für den Interpolationsfehler auf $I_x \times I_y$:

$$\|K - I_{n,I_x \times I_y}^{2D,Tsch} K\|_{C(I_x \times I_y)} \leq Cq^n.$$

b) Für eine Teilmenge $\mathcal{I} = \{i \in \mathbb{N} \,|\, I_{lower} \le i \le I_{upper}\}$ der Indices bezeichnet $\mathtt{BB}(\mathcal{I})$ die "bounding box", d.h. das kleinste Intervall, das alle Punkte x_i, $i \in \mathcal{I}$, enthält (siehe (1) für die Definition von x_i). Damit können wir den Zulässigkeitsbegriff auf Indexmengen ausdehnen: Zwei Teilmengen $\mathcal{I}$, $\mathcal{J} \subset \{1, \ldots, N\}$ heißen zulässig, falls

$$\max\{\mathrm{diam}\mathtt{BB}(\mathcal{I}), \mathrm{diam}\mathtt{BB}(\mathcal{J})\} \le \frac{1}{2}\mathrm{dist}(\mathtt{BB}(\mathcal{I}), \mathtt{BB}(\mathcal{J})). \tag{6}$$

Sind $\mathcal{I}$ und $\mathcal{J}$ zulässig, dann kann der zugehörige Matrixblock $M(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ durch eine Matrix vom Rang $n+1$ nach obigem Schema gut approximiert werden, indem in der Definition von $M(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ die Funktion K durch $I^{2D,Tsch}_{n,\mathtt{BB}(\mathcal{I})\times\mathtt{BB}(\mathcal{J})}K$ ersetzt wird; dies führt dann wie in Aufg. 3,c) auf eine Approximation der Form

$$M^{approx}(\mathcal{I}, \mathcal{J}) := WSV^\top, \qquad \text{mit } W \in \mathbb{R}^{|\mathcal{I}|\times(n+1)}, \qquad V \in \mathbb{R}^{|\mathcal{J}|\times(n+1)}, \quad S \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$$

5. Die Aufgabe ist deshalb, eine möglichst gute Partition der Matrix M in gut approximierbare Blöcke zu finden. Jeder Matrixblock wird beschrieben durch

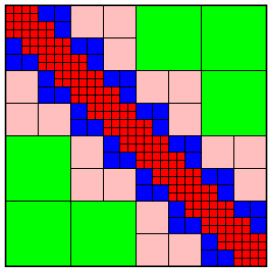
```
struct block {
int I_lower, I_upper;// Grenzen der Zeilenindizes des Blocks
int J_lower, J_upper;// Grenzen des Spaltenindizes des Blocks
int rank;            // der Rang
double* V;           // V ist (I_upper - I_lower+1) * rank Matrix
double* W;           // W ist (J_upper - J_lower+1) * rank Matrix
double* S;           // S ist eine rank * rank Matrix
double* F;           // Darstellung des Blocks als volle Matrix F
                     // Groesse:(I_upper-I_lower+1)*(J_upper-J_lower+1)
int typ;             // typ=EXACT: Darstellung des Blocks als Matrix F
                     // typ=APPROX: Darstellung des Blocks als W S V'
}
```

Der folgende *greedy algorithm* erzeugt nun eine Liste blocklist mit Elementen vom Typ struct block, so daß jeder Block entweder zulässig ist (und damit wird der Block in der Form $WSV^\top$ dargestellt) oder er ist "klein" (und wird damit als vollbesetzte Matrix F dargestellt):

```
build_blocks(I_lower,I_upper,J_lower,J_upper,blocklist){
if ( (I_upper==I_lower) || (J_upper==J_lower) ) {
 block newblock;
 newblock.I_lower = I_lower; newblock.I_upper = I_upper;
 newblock.J_lower = J_lower; newblock.J_upper = J_upper;
 newblock.typ = EXACT;  // Block wird als Matrix M dargestellt
 append_to_blocklist(blocklist,newblock);
 }
else {
 if admissible(I_lower,I_upper,J_lower,J_upper) {
 block newblock;
 newblock.I_lower = I_lower; newblock.I_upper = I_upper;
 newblock.J_lower = J_lower; newblock.J_upper = J_upper;
 newblock.typ = APPROX; // Block wird in der Form W S V' dargestellt
 append_to_blocklist(blocklist,newblock);
 } else {
   I_mid = (I_lower+I_upper)/2;
   J_mid = (J_lower+J_upper)/2;
```

```
    build_blocks(I_lower ,I_mid    ,J_lower ,J_mid ,blocklist );
    build_blocks(I_mid+1,I_upper ,J_lower ,J_mid ,blocklist );
    build_blocks(I_lower ,I_mid    ,J_mid+1,J_upper ,blocklist );
    build_blocks(I_mid+1,I_upper ,J_mid+1,J_upper ,blocklist );
    }
}
}
```

Die Blockstruktur, die dieser Algorithmus erzeugt, sieht dann im Prinzip so aus:



Programmieren Sie die Erzeugung dieser Blockliste. Greifen Sie hierzu auf die Datenstrukturen zurück, die Sie auf `http://www.math.tuwien.ac.at/~melenk/teach/numerik_WS0708/projekte` finden. Gehen Sie in mehreren Schritten vor:

1. Schreiben Sie die oben fehlenden Funktionen append_to_blocklist und admissible.
2. In einem ersten Durchlauf wird build_blocks (1,N,1,N, blocklist) aufgerufen, um die Blockliste (ohne die Matrizen F, V, W, S) zu erzeugen.
3. In einem zweiten Durchlauf, werden dann die Matrizen V, W, S oder F für jeden Block erzeugt. Schreiben Sie ein Programm, das durch blocklist geht und für jeden Block die entsprechende Matrix erzeugt, d.h.
   - falls typ = EXACT, dann wird die Matrix F mit den Werten von $M|_{\mathcal{I}\times\mathcal{J}}$ gefüllt.
   - falls typ = APPROX, dann werden die Matrizen W, S, V mittels Tschebysheffinterpolation erzeugt.

6. In der vorangegangen Aufgabe haben Sie die Matrix M blockweise approximiert. Es soll nun numerisch untersucht werden, wie groß der Speicherbedarf für blocklist ist und wie genau die erhaltene Approximation ist.

a) Für festes $n = 0, \ldots, 5$ und $N = 2^i$, $i = 2, \ldots, 15$ berechnen Sie den Speicherbedarf Ihrer blocklist , indem Sie blocklist aufstellen und anschließend einmal durchgehen und den Speicherbedarf aller Blöcke aufsummieren. Stellen Sie das Ergebnis graphisch dar.

b) Für festes $N = 2^i$, $i = 6, \ldots, 10$ und $n = 0, \ldots, 5$ bestimmen Sie die Genauigkeit Ihrer Approximation in der Frobeniusnorm. Gehen Sie hierzu wie folgt vor: Gehen Sie durch blocklist , stellen Sie für jeden Block des Typs APPROX die Matrix $M|_{\mathcal{I}\times\mathcal{J}}$ exakt auf und bestimmen Sie $\|M|_{\mathcal{I}\times\mathcal{J}} - WSV'\|_F^2$. Summieren Sie diese Fehler über alle Blöcke. Stellen Sie das Ergebnis graphisch dar.

7. Die Matrix M hat spezielle Struktur[1]: Überlegen Sie sich, daß, $M_{ij} = m_{i-j}$ für einen geeigneten Vektor m. Formulieren Sie einen FFT-basierten Algorithmus, mit dem man die Matrix-Vektor-Multiplikation $x \mapsto Mx$ mit Aufwand $O(N \log N)$ für Zweierpotenzen N realisieren kann.

[1] M ist eine sog. Töplitzmatrix